



TITLE:

HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

廣瀬, 崇至

CITATION:

廣瀬, 崇至. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2015, 2014: 88-88

ISSUE DATE:

2015-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/197615>

RIGHT:

HOPG 基板上における分子配列のモデリング

Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 廣瀬 崇至

【背景と目的】

単一の分子を電子素子として応用することを目指す分子エレクトロニクス分野は、より高度な動作原理をもつデバイスおよび究極の省エネルギーデバイスを実現する観点から近年大きな注目を集めている。走査型トンネル顕微鏡 (STM) は単一分子を識別できる優れた空間分解能を有しており、基板上に固定された分子の電気的特性を調査すること可能である。ジアリールエテンは、着色体の熱安定性や高い光耐久性を有するフォトクロミック化合物であり、分子レベルでのスイッチング素子やメモリー材料としての応用が期待されている。本研究では、我々の研究室で合成したジアリールエテン誘導体の分子配列を高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 基板上において観測し、その光応答性を検討することを目的とした。

【検討内容】

本研究で用いたジアリールエテンは、紫外・可視光照射により開環体と閉環体の間で可逆な光異性化反応を示すことが知られている。また、閉環体に紫外光を照射すると、光不可逆的に第三の異性体である縮環体へと光変化する性質が認められる。本研究では、この 3 種の光異性体がオクタン酸/HOPG 界面上でそれぞれ異なる分子配列を形成するという知見が得られており、グラファイト基板上で分子がどのように配列するのかを MM/MD 計算を用いて評価することを試みた。

【結果・考察】

STM 測定によって得られた分子配列は、Material Studio を用いた分子モデル計算により良く再現することができ、ジアリールエテンの開環体 (1o)、閉環体 (1c)、および縮環体 (1a) がそれぞれ異なるパッキングで分子配列を形成することが明らかとなった (Figure 1)。分子配列の濃度依存性の詳細な調査により、開環体配列と閉環体配列中において両異性体が互いに混ざり合う混晶の挙動を示すことが示唆された。このような成分の混ざり合いは、分子配列形成時の協同性パラメーターに大きな影響を与える知見も同時に見いだされた。以上のような固液界面での多成分の混ざり合いやその分子配列の光応答性はこれまでに報告された例が極めて少なく、光応答性の二次元分子配列挙動を分子レベルで設計・制御する上で重要な指針を得ることに成功した。

【参考論文】

"Diarylethene Self-Assembled Monolayers: Cocrystallization and Mixing-Induced Cooperativity Highlighted by Scanning Tunnelling Microscopy at the Liquid/Solid Interface", Denis Frath, Takeshi Sakano, Yohei Imaizumi, Soichi Yokoyama, Takashi Hirose, Kenji Matsuda, *Submitted*.

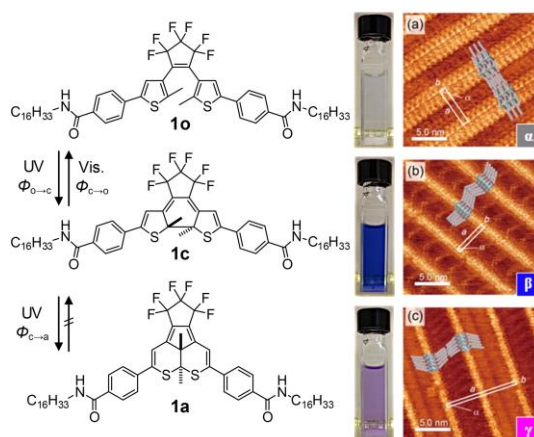


Figure 1. Chemical structures and STM images of (a) the open-ring isomer **1o** (ordering α), (b) the closed-ring isomer **1c** (ordering β), and (c) the annulated isomer **1a** (ordering γ).